

## Литература

1. Natural Products for Drug Discovery in the 21st Century: Innovations for Novel Drug Discovery / N.E. Thomford [et al.] // Int. J. Mol. Sci. – 2018. – Vol. 19. – P. 1578–1606.
2. Ng, Y.P. Plant alkaloids as drug leads for Alzheimer's disease / Y.P. Ng, T.C.T. Or, N.Y. Ip // Neurochem. Int. – 2015. – Vol. 89/ – P. 260–270.
3. Spectroscopic, structural and anticancer activity studies of (-)-cytisine halogenated N-benzyl derivatives / A.K. Przybył [et al.] // J. Mol. Struct. – 2019. – Vol. 1176. – P. 871–880.
4. Synthesis and antiviral evaluation of cytisine derivatives against dengue virus types 1 and 2 / I.P. Tsypysheva [et al.] // Bioorg. Med. Chem. Lett. – 2021. – Vol. 54. – № 128437.
5. Synthesis and Biological Activity of *N*-acyl Anabasine and Cytisine Derivatives with Adamantane, Pyridine and 1,2-Azole Fragments / Mukusheva G.K. [et al.] // Molecules. – 2022. – Vol. 27, №. 21. – № 7387 (19 p.)
6. The synthesis of isoxazolyl- and isothiazolylcarbamides exhibiting antitumor activity / V. I. Potkin [et al.] // Russian Journal of Organic Chemistry. – 2014. – Vol. 50, № 11 – P. 1667–1676.

## НЕРАВНОВЕСНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА

Алдабергенов М.К., Балакаева Г.Т.  
ТОО «Modern Chemistry», Алматы  
[aldabergenov\\_m@mail.ru](mailto:aldabergenov_m@mail.ru)

В развитой лауреатом Нобелевской премии И.Пригожиным [1] в нелинейной термодинамике неравновесных процессов необратимость играет важную конструктивную роль. Постулируя второе начало термодинамики как фундаментальный физический факт И.Пригожин выдвигает теории диссипативных систем и бифуркаций. Совершающийся в такой открытой системе неравновесный процесс связан с диссипацией, т.е. с производством энтропии. Необратимые процессы являются движущей силой, создающей порядок системы. В химических реакциях, далеких от равновесного состояния, упорядоченные структуры возникают под действием нелинейных взаимодействий в точке бифуркации и приводят к производству энтропии.

Второе начало термодинамики представляет изменение энтропии открытой системы в виде двух составляющих [2]:

- производство энтропии за счет необратимых процессов;
- обмен энтропии с окружающей средой.

Неравновесная термодинамика, прежде всего, термодинамика химической реакции. Изучая превращения компонентов при химических

реакциях в области далекой от равновесия в системе CaO-SiO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>Oнами использованы два подхода:

- «среднеэлектронная функция Гиббса» [3,4];
- триангуляция многокомпонентной системы по Курнакову [5].

Физический смысл «среднеэлектронной функции Гиббса» ( $\Delta\bar{G}_{298}^0$ ) [3,4] заключается в определении химической связи как коллективного эффекта электронно-ядерного взаимодействия. Она рассчитывается делением значения энергии Гиббса образования соединения на общее количество электронов в данном соединении и на число Авогадро (с переводом в эв.) [6], т.е. определяет плотность энергии образования соединения, приходящуюся на один электрон. «Среднеэлектронная функция Гиббса» при образовании связей адекватно реагирует на все изменения в структуре соединения, позволяет судить о реакционной способности соединения, об его устойчивости [4], определить значение химического потенциала и сродства, вычислить производство и поток энтропии, термодинамическую силу, термодинамическую «вероятность» взаимодействия, степень превращения компонентов в ходе химической реакции, описать процессы «самоорганизации», провести триангуляцию многокомпонентных систем и установить механизмы реакций. «Среднеэлектронная функция Гиббса» интерпретируется нами как химический потенциал вещества, т.е.  $\bar{G}_{298}^0 = \mu$ . Химический потенциал  $\mu_i$  является парциальной мольной величиной и можно говорить о химическом потенциале компонента в каждой точке системы точно так же, как говорят о его концентрации или мольной доле.

Процессы эволюции в химических реакциях могут быть описаны на основе превращения фазового состава соединений системы как причинно-следственные связи между фазами. Такая задача может быть решена через учение Курнакова посредством триангуляции систем [5]. Диаграмма состав-свойство - точная геометрическая модель той сложной функции, которая отображает зависимость между температурой, объемом, концентрацией и другими физическими и химическими факторами, определяющими состояние открытой системы, т.е. в диаграмме состав-свойство связываются в одно неразрывное целое химические превращения вещества и геометрические преобразования пространства. Через триангуляцию системы CaO-SiO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O описаны химические реакции, протекающие при взаимодействии силикатов в точке бифуркации.

Химические реакции в открытой системе сопровождаются прямыми и обратными превращениями компонентов. При всех превращениях система начинает производить энтропию. Производство энтропии обратного превращения названо негэнтропией [6]. Согласно II началу термодинамики производство энтропии является положительной величиной. Поэтому негэнтропия также положительная величина. Разница между производством энтропии прямого и обратного превращений (негэнтропии) названо полезным производством энтропии. Полезное производство энтропии расходуется на

обмен с внешней средой и на увеличение энтропии диссипативных структур. Негэнтропия является барьером для роста полезного производства энтропии системы, преодолеть которую могут не все реакции. Соотношение между полезным производством энтропии и негэнтропией определяет путь эволюции системы в бифуркационной точке.

На основании «среднеэлектронной функции Гиббса» и на примере триангуляции системы  $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$  рассчитаны производство энтропии, негэнтропия, поток энтропии, общее изменение энтропии, сродство, термодинамическая сила, температура превращений, константа скорости. При химических реакциях производство энтропии и негэнтропия существуют параллельно [6].

В химической реакции в точке бифуркации система теряет устойчивость и переходит в неравновесное состояние, в которой возможно приобретение нового качества эволюции динамической системы. Происходит перестройка характера движения и структуры системы. При движении системы к точке бифуркации значительную роль играет химический потенциал и сродство системы. В точке бифуркации система начинает производить энтропию, прохождение реакции характеризуется определенной константой скорости. Именно от этих факторов зависит, по какой эволюционной ветви пойдет система, пройдя через точку бифуркации. При взаимодействии химических реагентов в реальной системе возможно определение всех путей эволюции системы. Ведь эволюционные процессы между двумя точками бифуркаций подчиняются детерминистским закономерностям.

Таким образом, в открытой системе в точке бифуркации при протекании химической реакции появляются как производство энтропии, так и негэнтропия. Производство энтропии действует в прямом направлении, а негэнтропия – в обратном направлении.

Негэнтропия – производство энтропии обратного превращения.

Негэнтропия является сжимающейся составляющей, которая препятствуют дальнейшему протеканию химической реакции и эволюции системы.

Полезное производство энтропии составляет растягивающиеся силы за счет образования диссипативных структур. Диссипативные структуры приводят к образованию конечных соединений с более высокой энтропией и менее сложной структурой.

С появлением сжимающей и растягивающей сил за счет негэнтропии и производства энтропии наблюдается нарушение симметрии унитарной эволюции и переход ее в неунитарную.

## Литература

1. Пригожин И. От существующего к возникающему. Время и сложность в физических науках. М.: Наука, 1995. 328с.

2. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002. 461с.
3. Aldabergenov M., Balakaeva G., Kassenov B. Applied Chemical Thermodynamics. Berlin.: LAP Lambert, 2012. 350p.
4. Balakaeva G., Aldabergenov M. The Gibbs function normalized to the total number of electrons //Journal of Materials Science and Engineering. 2012. В. 2(6). P.394-403.
5. Курнаков Н.С. Введение в физико-химический анализ. М-Л.: АН СССР, 1940. 563с.
6. Aldabergenov M. Production Entropy and Negentropy //American Journal of Physical Chemistry. Vol. 10, No. 2, 2021, pp. 25-30.doi: 10.11648/j.ajpc.20211002.12

## **ҚЫЗЫЛ ШЛАМДЫ АҒЫНДЫ СУЛАРДЫ ТАЗАРТУ ҮШІН ҚОЛДАНУ**

Алжанова Г.Ж., Айбульдинов Е.К., Искакова Ж.Б., Жанбулатова Г.А.  
Л. Н. Гумилев атындағы ЕҰУ Жаңа химиялық технологиялар  
ғылыми-зерттеу институты

Қызыл шлам – алюминий өнеркәсібінің жанама өнімі. Оның құрамында 60%-ға дейін металдардың оксидтерінен тұрады, кремнийдің оксиді, сонымен қатар қоршаған ортаға кері әсерін тигізетін сілті және ауыр металдар кездеседі. Қызыл шламның құрамындағы темірдің мөлшеріне байланысты түсі қызыл немесе қоңыр-қызыл болуы мүмкін. Қазіргі таңда қызыл шламды құрылыс материалы, керамика өндірісі үшін шикізат ретінде және ағынды сулардың адсорбенті ретінде пайдаланудың потенциалы өте жоғары [1].

Өнеркәсіптік және ауылшаруашылық салалардың қарқынды дамуы табиғи су қорларының ластануына, атап айтқанда ондағы металдар мен бейметалдар иондарының, органикалық еріткіштердің, бояулардың және т.б. заттардың көбеюіне алып келуде. Мұндай ластанған сулар су ағзалары үшін улы, ішуге және дақылдарды суаруға жарамсыз етуі мүмкін, сондықтан ағынды суларды тазартудың тиімді әдістерін зерттеу өзекті мәселеге айналды [2]. Қызыл шламның бөлшектері өте ұсақ, көп жағдайда диаметрі шамамен 0,005-0,075 мм, алайда беттік ауданының үлкендігі металдар абсорбциясына ықпал ететін химиялық қасиетке ие. Онымен кальций мен магний иондарының аздаған мөлшері күшті сілтілік ортада еритін карбонаттармен оңай тұнбаға түсіп микроэлементтердің адсорбциялануын қамтамасыз ете алады [3]. Сонымен қатар салыстырмалы түрде сілтілігі күшті қызыл шлам қорғасын, хром, мышьяк сынды ауыр ауыр металдар мен зиянды қалдықтарды ағын сулар мен топырақтан абсорбцияға өте қолайлы. Қызыл шламның осы сіңіргіш қасиеттерін және құрылыс материалдары ретінде пайдалы өнімге айналдыру